シュレディンガー方程式

シャンチー

2005.2.21

1　定常状態

シュレディンガー方程式において、ポテンシャル $V(\boldsymbol{r})$ が時間に無関係な場合には、簡単になる
つまりハミルトニアン

$$H = \frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V(\boldsymbol{r})$$

が時間を陽に含んでいないので、解を変数分離した

$$\psi(\boldsymbol{r}, t) = f(t)\phi(\boldsymbol{r})$$

と仮定してシュレディンガー方程式に代入し、$f(t)\phi(\boldsymbol{r})$ で割ると

$$\frac{i\hbar}{f(t)}\frac{df(t)}{dt} = \frac{1}{\phi\boldsymbol{r}}[\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V(\boldsymbol{r})]\phi(\boldsymbol{r})$$

が得られる。左辺は t だけ右辺は $\boldsymbol{r}$ だけに関係しているので、両辺が等しくなるためには同じ定数 E でないとならない。f に関する積分は

$$f(t) = exp(-\frac{iEt}{\hbar})$$

一方の方程式は、時間を含まないシュレディンガー方程式といい

$$[\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V(\boldsymbol{r})]\phi(\boldsymbol{r}) = E\phi(\boldsymbol{r}) \tag{1}$$

となり、上の方程式が E を決定する。結局波動方程式の特解である定常解は

$$\psi(\boldsymbol{r}, t) = exp(-\frac{iEt}{\hbar})\phi(\boldsymbol{r})$$

となり、$|\phi(\boldsymbol{r},t)|^2 = |\psi(\boldsymbol{r})|^2$ なので、各点ごとの存在確率は時間に無関係である。よってこの解を定常状態という。
ところで、今、定常解になることは見て来た訳だが、E には二つの決まり方がある。それは束縛状態と連続スペクトルと呼ばれるものだ。